

ФАЗОВІ РІВНОВАГИ В СИСТЕМІ Cd-Te

Гриців В.І., Рибак Т.М.

Житомирський державний університет імені Івана Франка

Кадмій телурид володіє унікальними електронними властивостями і є одним із найважливіших напівпровідникових матеріалів групи B^2A^6 . Разом з тим, при широких областях практичного використання, до цього часу залишається недослідженою поведінка CdTe в околі точки топлення. У даній роботі з використанням закономірностей атомно-молекулярної взаємодії досліджено поведінку кадмій телуриду в розплавах кадмію і телуру. Виконано аналіз діаграми стану системи Cd-Te, оцінено можливості кипіння кадмію та телур і на цій основі розглянуто положення області двофазної рівноваги “рідина - газ”. Для систем Cd-CdTe та CdTe-Te вплив тиску пари компонентів має важливе значення, тому що кадмій закипає при 1039,7 K, а телур при 1285,0 K.

З використанням комп’ютерного моделювання одержано оптимізовані значення температур ліквідуса систем CdTe-Cd та CdTe-Te, виявлено характерні точки на лінії ліквідуса та розкрито процеси, що характеризують поведінку CdTe в розплаві кадмію та телуру. Оптимізацію температур проведено виходячи із геометричної властивості лінії ліквідуса, а аналіз ліній ліквідусу виконано без врахування тиску пари. В обох підсистемах, точки між 40-50 ат. % Te та 50-60 ат. % Te поліномами не описуються і ці точки потребують окремого дослідження.

Встановлено, що лінія ліквідуса системи Cd-Te як з сторони кадмію, так і з сторони телуру не описується класичною теорією розплавів, яка перевірена на інших системах, зокрема CdTe-Cu(Ag), ZnTe-PbTe.

Висунуто припущення, що однією з імовірних причин аномальної поведінки CdTe при температурах в околі точки прийнятої в довідниках за температуру топлення ($T_{\text{топл}} = 1365 \text{ K}$), є високотемпературний перехід кристалохімічної модифікації сфалериту (s) у вюртцит (w). Залишається відкритим питання про температурні межі існування модифікації вюрциту в кристалі цієї сполуки. Проте, враховуючи, що високотемпературне перетворення $s \rightarrow w$ встановлено в усіх інших халькогенідах цинку та кадмію, найбільш імовірно, збільшення температури топлення CdTe в результаті високотемпературної термообробки зразка, можна пояснити переходом сфалерит $s \rightarrow w$ та утворенням високотемпературної стабільної модифікації вюрцита.

Одержані результати можуть бути використані для аналізу лінії ліквідуса, технологічної очистки кадмій телуриду від домішок шляхом екстракції розтопленим кадмієм або телуром та цілеспрямованого синтезу кадмій телуриду із наперед заданими властивостями.